

# ПРИМЕНЕНИЕ КВАНТОВО-ХИМИЧЕСКОГО МЕТОДА МР6 И МКЭ К РАССЧЕТУ УПРУГИХ МОДУЛЕЙ ГРАФЕНА

**Матулис В. Э., Матулис В. Э., Нагорный Ю. Е., Репченков В. И.,  
Ивашкевич О. А.**

*Белорусский Государственный университет, Минск, Беларусь,  
e-mail: nagorny.yury@gmail.com*

Учитывая, что квантово-химический расчет, даже для нескольких сотен атомов, занимал от нескольких часов до дней, а применение метода конечных элементов (МКЭ) – несколько минут, то представляется перспективным использовать результаты, полученные первым методом для корректировки входных параметров второго. Например, можно осуществить переход к приближению Юри-Бредли, добавив в МКЭ новые параметры и таким образом сблизить результаты с МР6 [1], [2].

В качестве базы берутся расчеты в приближении валентно силового поля. Модуль Юнга для обоих моих растет с выходом на асимптоту, но для ВСП значения составляют только порядка 80% от величины для МР6.

С целью оценить влияние коэффициента жесткости упругого отрезка на величины упругих модулей были проведены расчеты, при которых его величина менялась от 80% до 120% от первоначального значения. Изменение  $k_1$  не приводит к изменению формы графика, а только лишь к его сдвигу вверх при увеличении коэффициента жесткости. Но, даже увеличив на 20%  $k_1$ , не удалось достичь величин, полученных в МР6. График коэффициент Пуассона в отличие от  $E$  с увеличением жесткости сдвигается не вверх, а вниз. То есть, при сближении по одному показателю происходит расхождение по другому. Следовательно, манипулируя только жесткостью упругого отрезка нельзя добиться совпадения графиков.

Следующим логичным шагом является рассмотрение влияния на результат изменения жесткости  $k_\theta$  углового элемента. Полученные результаты (рост модуля Юнга и уменьшение коэффициента Пуассона с ростом жесткости, как упругого отрезка, так и упругого угла) позволяет сделать вывод, что оставаясь в рамках ВСП невозможно совместить графики упругих модулей. Поэтому вводится дополнительный элемент. Это упругий отрезок, связывающий узлы, расположенные через два. Увеличение его жесткости приводит не только к сдвигу графика вверх, но и к увеличению скорости роста  $E$  на начальном отрезке. Уже при величине 5% от  $k_1$  удается превысить значения, полученные в МР6. Что касается коэффициента Пуассона, то рост жесткости уменьшает его значения, но мало. Введение элементов, модулирующих еще более удаленные связи дает надежду на сближение результатов с МР6 [2].

## Литература

1. Zhuravkov, M.A. Finite element modeling of nanoscale structures / M.A. Zhuravkov, Yu.E. Nagornyi, V.I. Repchenkov // Nanotechnologies in Russia – 2011. – V. 6, N. 9–10. – Pp. 597–606.